В. В. Васин, Об устойчивом вычислении производной в пространстве $C(-\infty, \infty)$,
Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1973, том 13, номер 6, 1383–1389

ЖУРНАЛ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Том 13 Ноябрь 1973 Декабрь № 6

УДК 518:517.948

ОБ УСТОЙЧИВОМ ВЫЧИСЛЕНИИ ПРОИЗВОДНОЙ В ПРОСТРАНСТВЕ $C(-\infty, \infty)$

В. В. ВАСИН

(Свердловск)

В задаче вычисления производной $f'(x)$ по функции $f(x)$, заданной с погрешностью δ в метрике $C(-\infty, \infty)$, строится оптимальный по порядку регуляризатор с «гладким» (бесконечно дифференцируемым) семейством приближенных решений. Проводится сравнительный анализ результатов численного эксперимента.

Пусть $C(-\infty, \infty)$ — множество непрерывных на действительной прямой функций, для которых конечна величина $\|f(x)\|_C = \sup\limits_{-\infty<x<\infty} |f(x)|$.

Предположим, что функция $f(x)\in C^1(-\infty, \infty)$, производная которой $f'(x)$ подлежит определению, задана с погрешностью, т. е. фактически вместо $f(x)$ известна некоторая функция $f_\delta(x)\in C(-\infty, \infty)$ такая, что $\|f_\delta(x)-f(x)\|_C\leqslant\delta$, где δ — заданный числовой параметр.

Хорошо известно, что задача вычисления значений неограниченного оператора (в частности, оператора дифференцирования) неустойчива к возмущениям исходных данных и, следовательно, ее решение требует применения общих принципов регуляризации некорректно поставленных задач [1]. Этот факт принципиальной неустойчивости задачи необходимо учитывать при выборе алгоритмов численного дифференцирования. Так, например, в работах [2, 3] на обширном числовом материале демонстрируется существенное преимущество (по точности) метода регуляризации А. Н. Тихонова перед обычным методом центральных разностей. В последнее время получили распространение алгоритмы численного дифференцирования, основанные на интерполяции функций кубическими сплайнами [4] и, в частности, регуляризованными сплайнами [5, 6].

В настоящей заметке предлагается регуляризующий алгоритм задачи дифференцирования в $C(-\infty, \infty)$, который в некотором смысле близок к оптимальному, дает гладкие приближенные решения и для его сходимости достаточно принадлежности производной $f'(x)\in C(-\infty, \infty)$.

1. Определим множество

$$M=\{f(x) : f''(x)\in C(-\infty, \infty),\ \|f''(x)\|_C\leqslant m\}.$$

В теоретическом плане наиболее интересными являются следующие две задачи.

Задача 1 (см. [7]). Найти величину

$$\inf_{T\in[C\to C]} \sup_{f\in M,\, \|\Delta f\|\leqslant\delta} \left\| Tf_\delta(x) - \frac{d}{dx} f(x) \right\|_C = \omega(\delta, M),$$

где $\Delta f(x) = f_\delta(x) - f(x)$, $[C\to C]$ — множество линейных ограниченных операторов из $C(-\infty, \infty)$ в $C(-\infty, \infty)$.

Задача 2 (см. [7]). Найти оператор $R^0 \in [C\to C]$, для которого

$$\sup_{f\in M,\, \|\Delta f\|\leqslant\delta} \left\| R^0 f_\delta(x) - \frac{d}{dx} f(x) \right\|_C = \omega(\delta, M),$$

т. е. это — задача нахождения оптимального линейного регуляризатора на множестве M и оценки максимальной погрешности, допускаемой этим регуляризатором.

Как отмечено С. Б. Стечкиным, оптимальный регуляризатор существует и совпадает с решением экстремальной задачи (задачи Стечкина [8]): найти оператор $R_\alpha{}^0$, удовлетворяющий соотношению

$$\sup_{\|f''(x)\|_C\leqslant m} \left\| R_\alpha{}^0 f(x) - \frac{d}{dx} f(x) \right\|_C = \inf_{\|S\|\leqslant 1/\alpha} \sup_{\|f''(x)\|\leqslant m} \left\| Sf(x) - \frac{d}{dx} f(x) \right\|_C,$$

где S — аддитивный и однородный оператор из $C(-\infty, \infty)$ в $C(-\infty, \infty)$, причем

$$(1.1)\qquad R^0 = R^0_{\alpha(\delta, M)} f(x) = \frac{f(x+\alpha) - f(x-\alpha)}{2\alpha}, \qquad \alpha(\delta, M) = \sqrt{(2\delta/m)},$$

$$(1.2)\qquad \omega(\delta, M) = \sqrt{(2\delta m)}.$$

В приложениях при восстановлении функции или ее производных обычно важно получить гладкие приближенные решения. Поэтому представляет интерес

Задача 3. Найти регуляризатор R_α в задаче дифференцирования с заданными свойствами гладкости на регуляризованное семейство приближенных решений $R_\alpha f_\delta(x)$ и такой, что

$$\sup_{f\in M,\, \|\Delta f\|\leqslant\delta} \left\| R_{\alpha(\delta, M)} f_\delta(x) - \frac{d}{dx} f(x) \right\|_C \backsim \omega(\delta, M),$$

где знак $\backsim$ означает, что величины имеют одинаковый порядок по δ.

Ниже строится регуляризатор R_α, для которого

$$(1.3)\qquad \omega(\delta, M) < \sup_{f\in M,\, \|\Delta f\|\leqslant\delta} \left\| R_{\alpha(\delta, M)} f_\delta(x) - \frac{d}{dx} f(x) \right\|_C \leqslant k\omega(\delta, M), \quad k < 2,$$

а $R_\alpha f_\delta(x)$ — бесконечно дифференцируемые функции, т. е. с максимальными в смысле гладкости условиями на приближенные решения. Заметим, что семейство $R_\alpha{}^0 f_\delta(x)$ (см. (1.1)) имеет гладкость не выше гладкости функции $f_\delta(x)$, которая вообще может быть не дифференцируемой. Оценка (1.3) показывает, что максимальная погрешность хуже погрешности, допускаемой оптимальным регуляризатором, не более чем в 2 раза с одним и тем же порядком по δ.

Результаты численных экспериментов показывают, что построенный регуляризатор в некоторых случаях (см. пример в п. 3) дает практически более высокую точность, чем оптимальный алгоритм (1.1). Это связано, по-видимому, с тем обстоятельством, что предварительное сглаживание исходной функции $f_\delta(x)$ повышает точность вычисления производной $f'(x)$.

2. В этом пункте мы докажем несколько утверждений о регуляризаторе, предложенном в [9], для случая пространства $C\ (-\infty,\infty)$.

Выпишем сначала несколько хорошо известных свойств усредняющих ядер и соответствующих им средних функций (см., например, [10]).

Функция двух переменных (усредняющее ядро)

$$\omega_\alpha(x;y)=\begin{cases}\left\{\int\limits_{-\alpha}^{\alpha}\exp[\eta^2/(\eta^2-\alpha^2)]\,d\eta\right\}^{-1}\exp\{(x-y)^2/[(x-y)^2-\alpha^2]\} & \text{при } |x-y|<\alpha,\\ 0 & \text{при } |x-y|\geqslant\alpha\end{cases}$$

удовлетворяет следующим свойствам:

1) функция $\omega_\alpha(x;y)$ непрерывна вместе со всеми производными на плоскости $(x;y)$;

2) при $|x-y|=\alpha$ функция $\omega_\alpha(x;y)$ и все ее производные равны нулю;

3) $$\int\limits_{|x-y|\leqslant\alpha}\omega_\alpha(x;y)\,dy=\int\limits_{|x-y|\leqslant\alpha}\omega_\alpha(x;y)\,dx=1;$$

4) средняя функция

$$f^\alpha(x)=\int\limits_{|x-y|\leqslant\alpha}\omega_\alpha(x;y)f(y)\,dy$$

от функции $f(x)\in C(-\infty,\infty)$ бесконечно непрерывно дифференцируема, причем

$$\frac{d^k}{dx^k}[f^\alpha(x)]=\int\limits_{|x-y|\leqslant\alpha}\frac{d^k}{dx^k}[\omega_\alpha(x;y)]f(y)\,dy.$$

Доказательство свойств 1) — 4) с несущественными изменениями проводится подобно [10], стр. 18—20.

Определим теперь искомый регуляризатор $R_\alpha\in[C\to C]$:

$$R_\alpha f(x)=\int\limits_{|x-y|\leqslant\alpha}\frac{d}{dx}\omega_\alpha(x;y)f(y)\,dy. \tag{2.1}$$

Лемма 1. *Пусть* $f(x)\in M=\{f(x):f''(x)\in C(-\infty,\infty),\ \|f''(x)\|_C\leqslant m\}$, *тогда справедлива оценка*

$$\sup_{f\in M}\left\|R_\alpha f(x)-\frac{d}{dx}f(x)\right\|_C\leqslant\alpha m.$$

Доказательство. Принимая во внимание свойства 1), 2) и интегрируя по частям, непосредственно получаем представление

$$R_\alpha f(x)=\int\limits_{|x-y|\leqslant\alpha}\frac{d}{dx}\omega_\alpha(x;y)f(y)dy=-\int\limits_{|x-y|\leqslant\alpha}\frac{d}{dy}\omega_\alpha(x;y)f(y)\,dy=$$
$$=\int\limits_{|x-y|\leqslant\alpha}\omega_\alpha(x;y)f'(y)\,dy, \tag{2.2}$$

т. е. $R_\alpha f(y)$ является средней функцией от $f'(x)$. Далее, из условий леммы, свойства 3) и формулы (2.2) имеем

$$\sup_{f\in M}\left\|R_\alpha f(x)-\frac{d}{dx}f(x)\right\|_C=\sup_{f\in M}\sup_{-\infty<x<\infty}\left|\int\limits_{|x-y|\leqslant\alpha}\omega_\alpha(x;y)f'(y)-\right.$$

$$\left.-\int\limits_{|x-y|\leqslant\alpha}\omega_\alpha(x;y)f'(x)\,dy\right|\leqslant$$

$$\leqslant\sup_{f\in M}\sup_{|x-y|\leqslant\alpha}|f'(y)-f'(x)|\int\limits_{|x-y|\leqslant\alpha}\omega_\alpha(x;y)\,dy\leqslant m\alpha.$$

Следствие 1. Если $f'(x)\in C(-\infty,\infty)$, то

$$\left\|R_\alpha f(x)-\frac{d}{dx}f(x)\right\|_C\leqslant\beta(\alpha,f'(x)),$$

где $\beta(\alpha,f'(x))$ — модуль непрерывности $f'(x)$; кроме того

$$\lim_{\alpha\to0}\sup_{f\in M}\left\|R_\alpha f(x)-\frac{d}{dx}f(x)\right\|_C=0.$$

Оба этих соотношения очевидным образом следуют из последней оценки в лемме 1.

Лемма 2. *Пусть* $f_\delta(x)\in C(-\infty,\infty)$, $f(x)\in M$ *и* $\|f_\delta(x)-f(x)\|_C\leqslant\delta$, *тогда справедлива оценка*

$$\sup_{f\in M}\|R_\alpha f_\delta(x)-R_\alpha f(x)\|_C\leqslant\frac{\delta h}{\alpha},\tag{2.3}$$

где

$$h=\left\{\int_0^1\exp[\eta^2/(\eta^2-1)]\,d\eta\right\}^{-1}\approx1.65.$$

Доказательство. Имеем

$$\|R_\alpha f_\delta(x)-R_\alpha f(x)\|_C=\sup_{-\infty<x<\infty}\int\limits_{|x-y|\leqslant\alpha}\left|\frac{d}{dx}\omega_\alpha(x;y)[f_\delta(y)-f(y)]\,dy\right|\leqslant\tag{2.4}$$

$$\leqslant\sup_{-\infty<y<\infty}|f_\delta(y)-f(y)|\sup_{-\infty<x<\infty}\int\limits_{|x-y|\leqslant\alpha}\left|\frac{d}{dx}\omega_\alpha(x;y)\right|dy\leqslant$$

$$\leqslant\delta\sup_{-\infty<x<\infty}\int\limits_{|x-y|\leqslant\alpha}\left|\frac{d}{dx}\omega_\alpha(x;y)\right|dy.$$

Делая последовательно замену переменных в интеграле $y-x=\xi$, $\xi^2/(\xi^2-\alpha^2)=u$, находим

$$\int\limits_{|x-y|\leqslant\alpha}\left|\frac{d}{dx}\omega_\alpha(x;y)\right|dy=c_\alpha\int_{-\alpha}^{\alpha}\left|\exp[\xi^2/(\xi^2-\alpha^2)]\frac{2\alpha^2\xi}{(\xi^2-\alpha^2)^2}\right|d\xi=\tag{2.5}$$

$$=2c_\alpha\int_0^\alpha\exp[\xi^2/(\xi^2-\alpha^2)]\frac{2\alpha^2\xi}{(\xi^2-\alpha^2)^2}\,d\xi=-2c_\alpha\int_{-\infty}^{0}\exp u\,du=2c_\alpha,$$

где

$$c_\alpha=\left\{\int_{-\alpha}^{\alpha}\exp[\xi^2/(\xi^2-\alpha^2)]\,d\xi\right\}^{-1}=\frac{1}{2\alpha}\left\{\int_0^1\exp[\eta^2/(\eta^2-1)]\,d\eta\right\}^{-1}.$$

Подставляя (2.5) в соотношение (2.4), получаем оценку (2.3).

Следствие 2. Имеем

$$\|R_\alpha\|_C^C \leqslant \frac{h}{\alpha} = \frac{1}{\alpha}\left\{\int_0^1 \exp[\eta^2/(\eta^2-1)]\,d\eta\right\}^{-1} \approx \frac{1}{\alpha}\,1.65.$$

Теорема 1. *При выполнении условий лемм 1, 2 имеет место оценка*

$$\sup_{f\in M,\ \|\Delta f\|\leqslant\delta}\left\|\frac{d}{dx}f(x)-R_\alpha f_\delta(x)\right\|_C \leqslant \sqrt{(2h)}\sqrt{(2m\delta)} < 1.83\omega(\delta, M).$$

Доказательство. Из очевидного неравенства

$$\sup_{f\in M,\ \|\Delta f\|\leqslant\delta}\left\|\frac{d}{dx}f(x)-R_\alpha f_\delta(x)\right\|_C \leqslant$$

$$\leqslant \sup_{f\in M,\ \|\Delta f\|\leqslant\delta}\left\|\frac{d}{dx}f(x)-R_\alpha f(x)\right\|_C + \sup_{f\in M,\ \|\Delta f\|\leqslant\delta}\|R_\alpha f(x)-R_\alpha f_\delta(x)\|_C$$

и результатов, полученных в леммах 1, 2, следует оценка

$$\sup_{f\in M,\ \|\Delta f\|\leqslant\delta}\left\|\frac{d}{dx}f(x)-R_\alpha f_\delta(\bar{x})\right\|_C \leqslant m\alpha+\frac{h\delta}{\alpha}=\varphi(\alpha). \tag{2.6}$$

Необходимое условие экстремума $\varphi'(\alpha)=0$ дает связь α с δ, при которой достигается минимум правой части в (2.6): $\alpha=\sqrt{(h\delta/m)}$; следовательно,

$$\sup_{f\in M,\ \|\Delta f\|\leqslant\delta}\left\|\frac{d}{dx}f(x)-R_\alpha f_\delta(x)\right\|_C \leqslant \sqrt{(2h)}\sqrt{(2m\delta)}.$$

Из соотношения (1.2) и теоремы 1 следует

Теорема 2. *Для регуляризатора* (2.1) R_α *при связи* $\alpha=\sqrt{(h\delta/m)}$ *справедливы неравенства*

$$\omega(\delta, M) \leqslant \sup_{f\in M,\ \|\Delta f\|\leqslant\delta}\left\|R_{\alpha(\delta, M)}f_\delta(x)-\frac{d}{dx}f(x)\right\|_C \leqslant k\omega(\delta, M),$$

где $k=\sqrt{(2h)}\approx 1.83$.

Замечания. 1. Регуляризатор R_α можно представить в виде произведения $R_\alpha=TS_\alpha$, где

$$S_\alpha f(x)=\int\limits_{|x-y|\leqslant\alpha}\omega_\alpha(x;y)f(y)\,dy,\qquad Tf(x)=\frac{d}{dx}f(x).$$

Легко показать (пользуясь рассуждениями в доказательстве лемм 1, 2), что $\|S_\alpha\|_C^C\leqslant 1$ и $\|(S_\alpha-E)f(x)\|_C \xrightarrow{\alpha\to 0} 0$ для любой $f(x)\in C(-\infty, \infty)$, т. е. S_α – фильтрующее в $D(T)$, а TS_α – нормальное регуляризующее семейства операторов (см. [11]).

2. Для численного нахождения приближенного значения производной $f'(\bar{x})$ в точке достаточно применить к интегралу в (2.1) какую-либо квадратурную формулу:

$$\sum_{k=1}^{n} A_k\frac{d}{dx}\omega_\alpha(\bar{x};y_k)f_\delta(y_k) \xrightarrow{n\to\infty} R_{\alpha(\delta,M)}f_\delta(\bar{x}) \xrightarrow{\delta\to 0} f'(\bar{x}),\qquad \alpha(\delta,M)=\sqrt{(h\delta/m)}. \tag{2.7}$$

Это позволяет избежать определенных трудностей решения экстремальных задач, возникающих при общем методе регуляризации [2, 3]. Кроме того численные примеры показывают, что если $f_\delta(x)$ задана аналитически (следовательно, возможно вычислять интеграл с любой степенью точности), то точность восстановления производной выше, чем в общем методе регуляризации, но метод более трудоемок и его численная реализация (по формуле (2.7)) связана, конечно, с бо́льшей затратой машинного времени.

3. Для иллюстрации практической сходимости алгоритма был проведен численный эксперимент. Дифференцировалась функция $f(x)=\sin x$, $0\leqslant x\leqslant \pi/2$. С этой целью в (2.1) при $\alpha=10^{-5}$ для каждой из 11 точек $\{\pi i/20,\ i=0, 1, \dots, 10\}$ отрезка $[0, \pi/2]$ применялась обобщенная формула Симпсона при $m=100$. Функция $f(x)=\sin x$ бралась с погрешностью двух типов. В первом случае $f_\delta(x)=f(x)+\delta_0$, где $\delta_0=\text{const}$. Во втором случае в формуле Симпсона к $f(x_k)$ добавлялась величина $\delta_1(-1)^k$. Величины δ_0, δ_1 принимали последовательно значения 10^{-4}, 10^{-5}, 10^{-6}. Результаты счета приведены в таблице, где через $\Delta f'$ обозначен модуль разности между точным и полученным приближенным значениями производной $f'(x)=\cos x$.

x_i	$\Delta f'\cdot 10^5$					
	$\delta_0=10^{-4}$	$\delta_1=10^{-4}$	$\delta_0=10^{-5}$	$\delta_1=10^{-5}$	$\delta_0=10^{-6}$	$\delta_1=10^{-6}$
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.193	0.094	0.071	0.137	0.090	0.034
3	0.261	0.182	0.259	0.140	0.139	0.092
4	0.105	0.115	0.198	0.025	0.121	0.018
5	0.251	0.202	0.594	0.069	0.228	0.591
6	0.039	0.001	0.400	0.402	0.181	0.438
7	1.292	0.795	0.453	0.031	0.168	0.197
8	0.104	1.481	0.326	0.662	0.639	0.491
9	1.169	0.657	0.035	0.853	0.648	0.787
10	0.945	1.412	1.150	1.075	0.021	0.075
11	1.481	0.715	0.540	0.395	0.776	0.520

Мы видим, что в рассмотренном примере производная, фактически, восстанавливается с той же точностью, с которой задана функция. Заметим также, что точность полученных результатов выше, чем это гарантируется оценкой (2.6) при оптимальной связи $\alpha(\delta, M)=\sqrt{(h\delta/m)}$, но и при α, выбранном из последнего соотношения, результаты близки к табличным. Интересно отметить, что оптимальный алгоритм (1.1) дает при тех же исходных данных гораздо меньшую точность. Если, например, аддитивная ошибка в разности равна $\delta_0=10^{-6}$, т. е. если $f_\delta(x+\alpha)-f_\delta(x-\alpha)=$ $=f(x+\alpha)-f(x+\alpha)+\delta_0$, то ошибка в производной $\Delta f'\cdot 10^5\approx 35.3$.

Если функция $f_\delta(x)$ задана таблично на «редкой» сетке, то применение алгоритма (2.1) может оказаться нецелесообразным из-за невысокой точности счета интеграла. В этом случае нужно либо предварительно проинтерполировать экспериментальную функцию, либо применять другие алгоритмы (см. [4–6, 12]).

Например, метод кубических сплайн-функций [5] для той же функции $f(x)=\sin x$ по 100 заданным точкам с 4 округленными десятичными знаками (т. е. $\delta\leqslant 5\cdot 10^{-5}$) дает среднеквадратичную ошибку $\approx 2.1\cdot 10^{-4}$ (ср. с таблицей).

Выбор конкретного алгоритма численного дифференцирования, естественно, должен зависеть от типа исходных данных и тех требований, которые к нему предъявляются (высокая точность, простота и экономичность и т. д.).

В заключение отметим, что задача восстановления производной $f^n(x)$ при $n>1$ решается заменой оператора (2.1) оператором

$$R_\alpha f(x)=\int\limits_{|x-y|\leqslant\alpha}\frac{d^n}{dx^n}\omega_\alpha(x;y)f(y)\,dy$$

при соответствующей связи $\alpha(\delta, M)$. Кроме того этот оператор будет регуляризатором в случае, когда оператор дифференцирования задан из $L_p[a, b]$ в $C(a, b)$.

При $p=2$ регуляризатор другого типа предложен в [13].

Все численные расчеты, использованные в настоящей работе, выполнены Б. Д. Федосеевым на ЭВМ М-220.

Поступила в редакцию 24.07.1972
Переработанный вариант 19.02.1973

Цитированная литература

1. А. Н. Тихонов. О регуляризации некорректно поставленных задач. Докл. АН СССР, 1963, **153**, № 1, 49–52.
2. В. Б. Демидович. Восстановление функции и ее производных по экспериментальной информации. В сб. «Вычисл. методы и программирование». Вып. 8. М., Изд-во МГУ, 1967, 96–102.
3. J. Cullum. Numerical differentiation and regularization. SIAM, J. Numer. Anal., 1967, 8, № 2, 254–265.
4. Дж. Алберг, Э. Нильсон, Дж. Уолш. Теория сплайнов и ее приложения. М., «Мир», 1972.
5. C. H. Reinsh. Smoothing by spline functions. Numer. Math., 1967, **10**, 177–183.
6. В. А. Морозов. О задаче дифференцирования и некоторых алгоритмах приближения экспериментальной информации. В сб. «Вычисл. методы и программирование». Вып. 14. М., Изд-во МГУ, 1970, 46–62.
7. В. Н. Страхов. О решении линейных некорректных задач в гильбертовом пространстве. Дифференц. ур-ния, 1970, **76**, № 8, 1490–1495.
8. С. Б. Стечкин. Наилучшее приближение линейных операторов. Матем. заметки, 1967, **1**, № 2, 137–148.
9. В. В. Васин. Регуляризация задачи численного дифференцирования. Матем. зап. Уральский ун-т, 1969, **7**, № 2, 29–33.
10. С. Л. Соболев. Некоторые применения функционального анализа в математической физике. Новосибирск, СО АН СССР, 1962.
11. В. Н. Страхов. Теория приближенного решения линейных некорректных задач в гильбертовом пространстве и ее использование в разведочной геофизике. I. Изв. АН СССР. Физ. Земли, 1969, № 8, 30–53.
12. Л. П. Грабарь. Применение полиномов Чебышева, ортонормированных на системе равноотстоящих точек, для численного дифференцирования. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1967, **7**, № 6, 1375–1379.
13. Т. Ф. Долгополова. Конечномерная регуляризация при численном дифференцировании периодических функций. Матем. зап. Уральский ун-т, 1970, **7**, № 4, 27–33.